

DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIERE,
INSTITUT RAYONNEMENT MATIÈRE DE SACLAY

SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES

SEMINAIRE *

Vendredi 19 mars 2010 à 11h00

Bâtiment 466, salle 111 - CEA Saclay, 91191, Gif sur Yvette

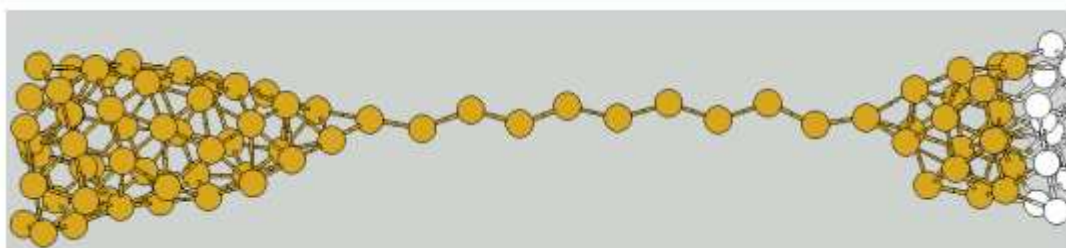
Mécanismes de formation et propriétés électroniques de fils de section atomique d'Au et de Pt

Rémy Zoubkoff

CINAM, Université de Marseille

Invité par Sylvain Latil

Cette présentation résume l'étude théorique concernant les fils de section atomique d'Au et de Pt réalisée au cours de ma thèse. Cette étude a été menée en utilisant un Hamiltonien de Liaisons Fortes donnant accès aux propriétés électroniques et à l'énergie totale. Les simulations de traction réalisées sur des nanofils cristallins en Dynamique Moléculaire ont fait apparaître des structures assimilables à des nanotubes évoluant avec la déformation appliquée. En poursuivant la traction de ces structures, j'ai observé la formation de structures planes (ou rubans) pour l'Au comme pour le Pt. Ces rubans permettent de former des fils de section atomique dans le cas d'Au contrairement au Pt, la différence étant liée aux propriétés mécaniques de ces éléments. Je présenterai également quelques résultats concernant les propriétés de transport électronique de ces structures, avec notamment une mise en évidence d'effets d'interférence destructive induits par la géométrie du système.



*** SERA PRECEDE D'UNE PAUSE-CAFE A PARTIR DE 10H30**

Formalités d'entrée : Contacter le secrétariat pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le centre de Saclay. Tel : 01.69.08.65.32 ou 01.69.08.40.12; Fax : 01.69.08.40.44 ; e-mail : catherine.julien@cea.fr. Le délai minimum est de 24 heures pour les visiteurs ressortissants des pays de l'Union Européenne, et de huit jours pour les autres. Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le centre de Saclay. Dans tous les cas, se munir d'une pièce d'identité.